数理解析研究所講究録
811巻 1992年 22-36

数式処理による数値積分

工学院大数学　牧野潔夫

I. はじめに

理学部以上に工学部では数式処理は普及していない。その原因はいくつかある。以下に考えられるものをあげると

1. 数式処理の教育があまりなされていない。
2. 数式処理のための良い例題集がほとんどない。
3. 工学系で扱う問題のほとんどは数式処理を必要としない。
4. 数式処理言語はむづかしいと思われている。
5. 数式処理は遅いと思われている。

1と2，3と4は互に関連がある。従がって良い例題をあつめて、できる範囲で学生に教育をしてゆくのが普及の第一歩であると考えられる。筆者は数年前から工学部の二年生に整数論のやさしい問題を数式処理（おもにREDUCE）で扱い教育してきた（[3]）。本年度は四年生の卒業研究も担当することになりそこで扱う数学の素材を次の事に留意して決定した。

1. 数学のある分野の体系的理論であるもの。但し教育（卒業研究）であるのでよく知られていて易しいもの。
2. 工学部の学生になじみのある分野

   微分積分学，線型代数学，数値計算，微分方程式，Fourier 変換，Laplace 変換，巾級数，ベクトル解析
3. 数値処理言語で扱うと面倒であるが数式処理言語で扱うと簡単になるもの

   多項式の取り扱い（G.C.D，L.C.M，...）

   有理式の取り扱い（四則，...）

   記号微積分（代数方程式の重根判定）

   行列の取り扱い（四則，行列式，固有多項式，...）

このような観点から卒業研究では「直交多項式とGauss型積分」に決定した。その理由は次のとうりである。

1. 直交多項式は多項式からなる，重みのついた積分を内積とする、計量線型空間の正規直交基底として定義されるが実際には漸化式で計算できる。多項式の漸化式は数式処理では楽に扱える。
2. Gauss 型積分にあらわれる直交多項式の根の性質はよく知られており Durand-Kerner 法以外にも Graeffe の方法や（初期近似値をうまく与えた）Newton 法で全根を

を求めることができ多種の代数方程式の解法を学ぶことができる。とくにGraeffeの方法はFortranやCでは後で述べるようにプログラムも複雑になるうえ、オーバフロー，アンダーフローになり易いが、数式処理ではこの困難は全くない。

3．Gauss型の積分は直交多項式の根より計算される重みとそこでの関数の値の積和で求められるが、与えられた関数のLagrange近似多項式の積分によっても計算される。数式処理ではこの近似多項式の適当な点での値やその係数のみでなく多項式そのものが得られる。

4．1．での直交多項式の生成，2．での多項式の根の近似計算，3でのLagrange近似多項式の生成などが数式処理（REDUCE）では独立に用ることができる。

即ち数式処理が他の言語と較べ優れていることが明瞭になるような計算（プログラム）を扱うことにした。

Ⅱ．直交多項式と積分

Vをxの多項式からなる線型空間としVに次の内積を入れる。

$$(f\ ,\ g) = \int_a^b f(x)\cdot g(x)\ \omega(x)\,dx \qquad (1)$$

($a=-\infty$, $b=\infty$ でもよい) ただし $w(x)$は $[a, b]$で正の値をとる連続関数である。このときVの基底$\{1, x, \ldots, x^n, \ldots\}$を Schmidtの直交化で直交化した正規直交基底を$\{\phi_0, \phi_1, \ldots, \phi_n, \ldots\}$ ($\deg \phi_n = n$) とする。

定理1.

$$\phi_n = k_n x^n + (n-1\text{次以下の部分}) \qquad (2)$$

とするとϕ_nは次の漸化式を満足する。

$$\phi_{n+1} - (A_n x + B_n)\phi_n + C_n \phi_{n-1} = 0 \qquad (3)$$

($n=0, 1, \ldots$) ただし $C_0 = 0$, $A_n = k_{n+1}/k_n$, $C_n = A_n/A_{n-1}$ ($n \geqq 1$) である。

証明

$\phi_{n+1} - A_n x\phi_n$ はA_nの定義より n次式だから $\phi_{n+1} - A_n x\phi_n = \sum_{k=0}^{n} \alpha_k \phi_k$ とかける。これとϕ_iとの内積を考えると $\alpha_i = -A_n(x\phi_n, \phi_i) = -A_n(\phi_n, x\phi_i) = 0$ ($0 \leqq i \leqq n-2$). 従がって $\alpha_0 = \alpha_1 = \cdots = \alpha_{n-2} = 0$
ここで$\alpha_n = B_n$, $\alpha_{n-1} = -C_n$ とおくと(2)が得られる。
更に$C_n = -\alpha_{n-1} = A_{n-1}(x\phi_n, \phi_{n-1}) = A_{n-1}(\phi_n, x\phi_{n-1})$ であり

$$x\phi_{n-1} = k_{n-1}x^n + \cdots = (k_{n-1}/k_n)\cdot(k_n x^n + \cdots)$$
$$= \phi_n/A_n + (n-1\text{次以下の部分})$$

であるから $C_n = A_{n-1}(\phi_n, x\phi_{n-1}) = (A_{n-1}/A_n)(\phi_n, \phi_n) = A_{n-1}/A_n$
となる。‖

定理２．

$\phi_n(x)=0$ は (a, b) に n 個の単根をもつ。

証明

$\phi_n(x)=0$ の (a, b) にある根で $\phi_n(x)$ の符号が変化するもの，即ち $\phi_n(x)=0$ の単根もしくは奇数重根を $x_1, x_2, \ldots, x_m$ とする（重根は1つに数える）。もし $m=n$ なら定理は示された。$m<n$ とする。$p(x)=\prod_{i=1}^{m}(x-x_i)$ とおくと $\phi_n(x)p(x)$ は (a, b) で常に同符号であるから

$$0 \neq \int_a^b p(x)\phi_n(x)w(x)\,dx = (p, \phi_n)$$

一方 $\deg p(x) < n$ より $(p, \phi_n)=0$．これは上の式と矛盾する．‖

定理３．

$K_n(x, y)=\sum_{i=0}^{n}\phi_i(x)\phi_i(y)$ と おくと

$$K_n(x, y) = \frac{k_n}{k_{n+1}}\left[\frac{\phi_n(y)\phi_{n+1}(x)-\phi_n(x)\phi_{n+1}(y)}{x-y}\right] \quad (4)$$

となる。

証明

$\phi_0(x)=k_0$, $\phi_1(x)=k_1x+\alpha$ とおくと $0=(\phi_0, \phi_1)=$
$\int_a^b(k_1x+\alpha)w(x)dx = \alpha\int_a^b w(x)dx + k_1\int_a^b x\,w(x)dx$
であり $1=(\phi_0, \phi_0)=k_0^2\int_a^b w(x)\,dx$ だから
$\alpha=-k_0^2k_1\int_a^b x\,w(x)\,dx$ となり $\phi_1(x)=k_1x-k_0^2k_1\int_a^b x\,w(x)dx$

故に $K_0(x, y)$ の定義より

$$K_0(x,y) = \phi_0^2(x)$$
$$= k_0^2 = \frac{k_0}{k_1}\left[k_0 k_1 (x-y))/(x-y)\right]$$
$$= \frac{k_0}{k_1}\left[\frac{\phi_0(y)\phi_1(x) - \phi_0(x)\phi_1(y)}{x-y}\right]$$

となり $n=0$ のとき成立する。

$n \geqq 1$ のとき定理1より

$$\frac{k_n}{k_{n+1}}\left[\frac{\phi_n(y)\phi_{n+1}(x) - \phi_n(x)\phi_{n+1}(y)}{x-y}\right]$$

$$= \frac{k_n}{k_{n+1}}\Big[\phi_n(y)\{(A_n x + B_n)\phi_n(x) + C_n \phi_{n-1}(x)\}$$
$$- \phi_n(x)\{(A_n y + B_n)\phi_n(y) + C_n \phi_{n-1}(y)\}\Big]/(x-y)$$

$$= \frac{k_n}{k_{n+1}} A_n \phi_n(x)\phi_n(y) + \frac{k_n}{k_{n+1}}\left[\frac{\phi_{n-1}(y)\phi_n(y) - \phi_{n-1}(x)\phi_n(y)}{x-y}\right]$$

となり $n-1$ まで定理が成立したとすれば $A_n = k_{n+1}/k_n$ だから上の式より n のときも成立する。||

以下 n を一つ固定し $\phi_n(x)=0$ の根を $x_1, x_2, \ldots, x_n$ とする。

定理3.

$f \in C^0[a, b]$ とする。$F(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k)\dfrac{\phi_n(x)}{(x-x_k)\phi_n'(x_k)}$

とおくと $F(x)$ は $n-1$ 次の多項式で $F(x_i)=f(x_i)$
$(i=1,2,...,n)$ である。

証明

$\phi_n(x)=0$ は各 x_k を根にもつから $\phi_n(x)/(x-x_k)$ は $n-1$ 次の多項式である。従がって $F(x)$ も $n-1$ 次の多項式である。更に

$$\lim_{x\to x_i}\frac{\phi_n(x)}{(x-x_k)}=\begin{cases}\phi_n'(x_i) & (i=k)\\ 0 & (i\neq k)\end{cases}$$

であるから

$$F(x_i)=\lim_{x\to x_i}F(x)=\sum_{k=1}^{n}\lim_{x\to x_i}f(x_k)\frac{\phi_n(x)}{(x-x_k)\phi_n'(x_k)}$$

$$=\sum_{k=1}^{n}f(x_k)\delta_{ik}\phi_n'(x_k)/\phi_n'(x_k)$$

$$=f(x_i)$$

これで定理が示された。 ||

$f(x)\in C^0(a,b)$ を $2n-1$ 次の多項式とすると $r(x)=(F(x)-f(x))/\phi_n(x)$ は、分子が $x_1,...,x_n$ で 0 になるから、$n-1$ 次の多項式である。又

$$f(x)=F(x)-r(x)\phi_n(x)$$

$$=\sum_{k=1}^{n}f(x_k)\frac{\phi_n(x)}{(x-x_k)\phi_n'(x_k)}-r(x)\phi_n(x)$$

となる。従がって

$$\int_a^b f(x)\,w(x)\,dx$$

$$= \sum_{k=0}^{n} f(x_k) \int_a^b w(x) \frac{\phi_n(x)}{(x-x_k)\,\phi_n'(x_k)}\,dx$$

$$- \int_a^b r(x)\,\phi_n(x)\,w(x)\,dx$$

$\int_a^b w(x)\,\phi_n(x)/\{(x-x_k)\,\phi_n'(x_k)\}\,dx = \lambda_k$ とおくと

$\deg r(x) \leqq n-1$ であるから $\int_a^b r(x)\,\phi_n(x) w(x)\,dx = (r, \phi_n)$
$= 0$ であるから

$$\int_a^b f(x)\,w(x)\,dx = \sum_{k=0}^{n} \lambda_k f(x_k) \qquad (5)$$

となる。λ_k の別な計算法を考える。

定理4.

$$\lambda_k = \int_a^b w(x) \frac{\phi_n(x)}{(x-x_k)\,\phi_n'(x_k)}\,dx \qquad (6)$$

とすると

$$\lambda_k = -\frac{k_{n+1}}{k_n} \frac{1}{\phi_n'(x_k)\,\phi_{n+1}(x_k)} \qquad (7)$$

$$= \frac{1}{\sum_{j=1}^{n-1} \phi_j^2(x_k)} \qquad (8)$$

$$= \int_a^b w(x) \left[\frac{\phi_n(x)}{(x-x_k)\phi_n'(x_k)} \right]^2 dx \qquad (9)$$

証明

$\phi_n(x_k)=0$ より

$$K_n(x, x_k) = \sum_{j=0}^{n-1} \phi_j(x)\phi_j(x_k)$$

$$= \frac{k_n}{k_{n+1}} \left[\frac{-\phi_n(x)\phi_{n+1}(x_k)}{x-x_k} \right]$$

故に
$$\frac{\phi_n(x)}{x-x_k} = \frac{-k_{n+1} K_n(x, x_k)}{k_n \phi_{n+1}(x_k)}$$

従がって

$$\lambda_k = \int_a^b w(x) \frac{\phi_n(x)}{(x-x_k)\phi_n'(x_k)} dx$$

$$= \frac{-k_{n+1}}{k_n \phi_n'(x_k)\phi_{n+1}(x_k)} \int_a^b w(x) K_n(x, x_k) dx$$

一般に $\deg p(x) \leqq n$ のとき $p(x) = \sum_{k=1}^{n} (p, \phi_k)\phi_k(x)$

とかけるから

$$(p, K_n(\ , y)) = (p, \sum_{k=1}^{n} \phi_k(y)\phi_k)$$

$$= \sum_{k=1}^{n} (p, \phi_k)\, \phi_k(y)$$

$$= p(y)$$

$p(x)=1$ のとき $(1,\ K_n(\ \ , y))=1$ だから任意の y に対して $\int_a^b w(x)\, K_n(x, y)\, dx = 1$。 $y = x_k$ とおくと上の式より

$$\lambda_k = -\frac{k_{n+1}}{k_n \phi_n'(x_k)\, \phi_{n+1}(x)}$$

更に $\displaystyle\sum_{j=1}^{n} \phi_j^2(x_k) = K_n(x_k\ x_k)$

$$= \lim_{x \to x_k} K_n(x, x_k)$$

$$= -\frac{k_n}{k_{n+1}} \phi_n'(x_k)\, \phi_{n+1}(x_k)$$

これは λ_k^{-1} であるから $\phi_n(x_k)=0$ を用いると

$$\lambda_k = 1 \Big/ \left(\sum_{j=1}^{n-1} \phi_j^2(x_k) \right)$$

最後の式であるが $f_k(x) = [\phi_n(x) / \{(x - x_k)\, \phi_n'(x_k)\}]^2$ は $2n-2$ 次式であるから

$$\int_a^b w(x)\, f_k(x)\, dx = \sum_{j=1}^{n} \lambda_j f_k(x_j)$$

となる。一方 $f_k(x_j) = \lim_{x \to x_j} f_k(x) = \delta_{kj}$ より

$$\lambda_k = \int_a^b w(x)\, f_k(x)\, dx$$

となりこれで定理が示された。‖

多項式でない $f \in C^0(a, b)$ に対し、$\int_a^b f(x)w(x)dx$ を $\sum_{k=1}^n \lambda_k f(x_k)$ で近似する。これが Gauss 型の定積分法である。これは次の様にも考えられる。

$$\rho_k(x) = \phi_n(x) / \{(x - x_k)\phi_n'(x_k)\}$$

とおくと $\rho_k(x)$ は x の $n-1$ 次の多項式である。

$f \in C^0(a, b)$ に対し

$$F(x) = \sum_{k=1}^n f(x_k)\rho_k(x)$$

とおくと定理3より $F(x)$ は $f(x)$ と $x = x_i$ $(1 \leqq i \leqq n)$ で一致する Lagrange 補完である。これを (a, b) で積分すると (6) より $\sum_{k=1}^n \lambda_k f(x_k)$ となる。即ち

$$f \in C^0(a, b) \xrightarrow[\text{Lagrang 補完}]{} F(x)$$

$$\xrightarrow[\int_a^b]{} \sum_{k=1}^n \lambda_k f(x_k) \quad : \text{Gauss 型積分}$$

となっている。又 $\int_a^b f(x)w(x)\,dx$ と $\sum_{k=1}^n \lambda_k f(x_k)$

との誤差は $f^{(n)}(\eta)/(k_n n!)$ $({}^{\exists}\eta \in (a, b))$ となることが示される。

又
$$\sigma_k(x) = \left[1 - (x - x_k)\frac{\phi_n''(x_k)}{\phi_n'(x_k)}\right]\rho_k^2(x),$$
$$\tau_k(x) = (x - x_k)\rho_k^2(x)$$
とおく。$f \in C'(a, b)$ に対し
$$G(x) = \sum_{k=1}^{n}\left\{f(x_k)\sigma_k(x) + f'(x_k)\tau_k(x)\right\}$$
とおくと　$G(x_i) = f(x_i)$, $G'(x_i) = f'(x_i)$ $(1 \leqq i \leqq n)$ が成立し更に $G(x)$ は x の $2n-1$ 次の多項式であることがわかる。つまり $G(x)$ は $f(x)$ の $x = x_i$ $(1 \leqq i \leqq n)$ で一致する Hermite 補完である。これは (a, b) で積分すると (9) より $\sum_{k=1}^{n}\lambda_k f(x_k)$ となることが示される。即ち
$$f \in C^1(a, b) \xrightarrow[\text{Hermite 補完}]{} G(x)$$
$$\xrightarrow[\int_a^b]{} \sum_{k=1}^{n}\lambda_k f(x_k) \quad : \text{Gauss 型積分}$$
となっている。

つまり与えられた関数 f を直交多項式の零点で Lagrange 又は Hermite 補完して得られた多項式を (a, b) で積分すると Gauss の積分公式が得られることになる。

Ⅲ. 実際の計算

Ⅱの理論のもとに与えられた関数 $f(x)$ に対し積分 $\int_a^b f(x)w(x)\,dx$ を求めるには以下の順序で計算を行えばよい。

i) 直交多項式 $\phi_n(x)$ を生成する。

ii) $\phi_n(x)=0$ の零点 $x_1, x_2, \ldots, x_n$ を求める。

iii) $x_1, x_2, \ldots, x_n$ より重み $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ を計算する。

iv) $\sum_{k=1}^{n} \lambda_k f(x_k)$ を求める。

もう少し具体的に [-1, 1] での積分を解説する。直交多項式は Legendre の多項式である。つまり n 次の Legendre 多項式 $P_n(x)$ を生成する必要がある。定理1の漸化式を用いればすぐ計算できるが Fortran, C 等の数値処理言語では $P_n(x)$ の次数を考え係数の配列を予めつくっておく必要がある。しかし数式処理ではこの漸化式はそのままの形でプログラムできる。ただそのままの形だと計算速度は遅いので少しは工夫がいるが式が扱えるのでたいへん都合がよい。

次に $P_n(x)=0$ を解くのであるが、一般には5次以上の代数方程式は四則と巾根で解けない。従がって数値計算によらざるを得ない。代数方程式の根の数値解法はよく研究されているが、まず与えられた方程式が重根をもつかどうかを判定す

るのがよい。数式処理では一変数関数の微分、多項式のG.C.D.など重根判断に必要な道具はそろっている。次に単根のみをもつ方程式を解くことになるが扱う方程式が前もってどの様な(実根かどうかなど)根かわかっていないときはDurand-Kerner法がよく用いられる。この方法は全根を同時に求める良い方法である。又扱う方程式が全て単実根のときGraeffeの方法を用いるのも良い。この方法は次の通りである。

$f_0(x) = x^n + a\ x^{n-1} + \cdots + a_{n1} = 0$ の根を $x_1, x_2, \ldots x_n$ とする。(但し $|x_1| > |x_2| > \cdots > |x_n|$ とする。) $f_0(x) = \prod_{j=1}^{n}(x - x_j)$ であるから $(-1)^n f_0(x) f_0(-x) = \prod_{j=1}^{n}(x^2 - x_j^2)$ となりこれを $f_1(x^2)$ とおくと $f_1(x)$ は $x_1^2, x_2^2, \ldots, x_n^2$ を根にもつ。これをくり返し $f_k(y) = (-1)^n f_k(x) f_k(-x)$ $(y = x^2)$ とすると $f_k(x)$ は $x_1^{2^k}, x_2^{2^k}, \ldots x_n^{2^k}$ を根にもつ。$f_k(x) = x^n + a_{1k}x^{n-1} + \cdots + a_{nk}$ $(k = 0, 1, 2, \ldots)$ とすると係数 a_{ij} は次の式を満たす。

$$a_{0k} = 1,\quad a_{ik} = (-1)^i a_{i\,k-1} + 2\sum_{j=} (-1)^j a_{j\,k-1}\, a_{2i-j\ k-1}$$

$$(i = 1, 2, \ldots, n-1,\ 2i - j > n),$$

$$a_{n,k} = (-1)^n a_{n\ k-1}^{\ 2},\quad a_{Nk} = 0\quad (N > n)$$

Fortran等ではこの式をプログラムしなければならないが数式処理では $(-1)^n f(x)\, f(-x) \longrightarrow f(x)$ をくり返すだけでよい。kを十分大きくとると $|x_1^{2^k}| >> |x_2^{2^k}| >> \cdots >> |x_n^{2^k}|$ だから根と係数の関係より

$$|x_1| \cong |-a_{1k}|^{1/2}, \quad |x_i| \cong |-a_{ik}/a_{i-1k}|^{1/2^k} \quad (i=2,\dots,n)$$

が得られる。

重み λ_k 及び $\sum_{k=1}^{n} \lambda_k f(x_k)$ の計算はほとんど問題がない。実際(9)は ϕ_n がより具体的に決まれば母関数などを用いて更に単純な形になる。
たとえば $\phi_n(x)=P_n(x)$ のときは $\lambda_k = 2(1-x_k^2)/[nP_{n-1}(x_k)]^2$ となることが示される。

IV. まとめ

以上のことを通じて数式処理の特長が次のようにわかった。

- 特別な工夫をしないで bignum, bigfloat の計算ができる。
- 多項式，有理式が扱えるのでプログラムが簡単になる。
- 同じハードで同じ計算を行うと遅い。ただし開発期間を含めれば速いと思われる。

参考文献

[1] 一松、宇野、山内「電子計算機のための数値計算法」I,II,III 培風館
[2] 長嶋秀世 「数値計算法」 槙書店
[3] 牧野潔夫 「数式処理を用いた数学及び情報教育」 計算機教育シンポジウム報告書 情報処理学会